

MODELO COMPUTACIONAL DEL FLUJO EN UN CONJUNTO DE INYECTORES LÍQUIDO-LÍQUIDO

Federico Bacchi^a, Ana Scarabino^a, Marcela Raviculé^b y Horacio Burbridge^b

^a*Grupo Fluidodinámica Computacional – GFC, Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata, Calle 116 e/ 47 y 48, 1900 La Plata, Argentina, gfc@ing.unlp.edu.ar*

^b*Gerencia de productos, procesos y técnicas analíticas, YPF Tecnología S.A., Avenida del petróleo argentino s/n entre 129 y 143. Berisso, Buenos Aires. C.P: 1923, Argentina, horacio.burbridge@ypftecnologia.com, <https://www.y-tec.com.ar>*

Palabras clave: Inyectores, Riser, Alquilación.

Resumen. En los procesos de alquilación el material a procesar, que incluye olefinas, ingresa al reactor a través de un conjunto de inyectores y se mezcla con el ácido fluorhídrico. Cuando el hidrocarburo entra en contacto con el ácido, se produce una reacción instantánea. Esta reacción requiere del contacto entre el material de carga y el catalizador, de modo que resulta crítico lograr una buena atomización y distribución uniforme de los hidrocarburos en el flujo de ácido.

Este trabajo muestra la implementación y resultados de la simulación numérica del flujo de hidrocarburos desde un conjunto de 34 inyectores hacia un conducto vertical con ácido fluorhídrico. Ambas sustancias se encuentran en fase líquida y sus densidades están en relación 0.62:1. En una primera etapa, con el objetivo de validar el modelo y contar con datos experimentales, se llevó a cabo un estudio experimental y numérico del flujo de agua coloreada a través de un único inyector, ingresando en un tanque lleno con agua limpia. Se realizaron mediciones de presión y visualizaciones de flujo que permitieron optimizar y validar el modelo numérico para ese caso. Posteriormente se replicó la geometría y malla para modelar el conjunto de 34 inyectores, el que requirió 14 millones de elementos para poder capturar las características más relevantes del flujo.

No se incluyeron en el cómputo modelos de reacción. Los resultados muestran la interacción de los flujos de los inyectores vecinos y el lecho de ácido y permiten identificar regiones críticas para el proceso de mezcla de ambos fluidos.

1. INTRODUCCIÓN

En el estudio de la inyección de un chorro de líquido en un lecho del mismo u otro líquido, encontramos referencias tan lejanas en el tiempo como Strutt y Rayleigh (1878), retomada en siguientes generaciones por Andrade y Tsien (1937) o Reynolds A. J. (1962). En estos casos se investigaba, a través de modelos teóricos y métodos experimentales, la estabilidad de un chorro axialsimétrico de un líquido, las inestabilidades que el mismo sufría y su evolución hasta distintos tipos de ruptura, que dependen del número de Reynolds entre otras variables. En los procesos industriales de inyección líquido-líquido, el objetivo suele ser la mezcla de ambos fluidos, de modo que se busca la inestabilidad y ruptura del chorro en gotas que aumenten la superficie de contacto (ver Richards *et al*, 1994). Las posibilidades de investigación de chorros a través de simulación computacional han permitido hallar diversos resultados para problemas industriales, en particular los de combustibles, hallándose numerosos ejemplos en el recientemente publicado trabajo de revisión de Raynal *et al* (2016).

Este trabajo presenta el análisis de un caso particular de inyección de líquido en líquido: se simula el flujo de hidrocarburos a través de un conjunto de 34 inyectores distribuidos en dos niveles, hacia un lecho de ácido fluorhídrico, en instalaciones destinadas al proceso de alquilación (ver API, 2012). En este proceso, los hidrocarburos (olefinas e isobutano, identificados de ahora en más como HC) se mezclan con el ácido fluorhídrico (HF), que actúa como catalizador de la reacción. Una mezcla y distribución uniforme es crítica para obtener combustibles de buena calidad, y también para prevenir efectos de corrosión u otros que alteren el funcionamiento normal de los equipos (Dobis, 2007).

Se lleva a cabo un estudio numérico del proceso de inyección de mezcla de olefinas e isobutano en un medio de ácido fluorhídrico líquido. El objetivo es identificar zonas críticas tales como zonas de remanso, recirculación, aceleración de flujo u otras, que puedan resultar perjudiciales para la formación de depósitos sólidos sobre los inyectores. La simulación no tiene en cuenta reacciones químicas. Para este estudio se consideran los reactivos que se atomizan y el producto que se forma como una misma fase hidrocarburo. Previamente un modelo numérico del flujo en un solo inyector es validado con experimentos de inyección de agua coloreada en agua limpia.

Los resultados muestran la interacción e influencia del flujo de inyectores vecinos en la configuración fluidodinámica global y permiten identificar regiones críticas para el proceso de mezcla.

2. METODOLOGÍA

El estudio se realizó en dos etapas: primero se llevaron a cabo experimentos y simulaciones numéricas del flujo de agua coloreada a través de un único inyector hacia un tanque cilíndrico parcialmente lleno con agua. De esta forma se tuvieron resultados experimentales para calibrar y validar el modelo numérico, y adicionalmente se acondicionó un banco de ensayos apto para distintos inyectores líquido-líquido y líquido-aire. Se compararon visualizaciones del flujo y filmaciones de alta velocidad con los resultados de la simulación, en particular el ángulo de apertura y la estructura del chorro de inyección, así como el movimiento del agua del depósito inducido por el mismo chorro.

Después de optimizar el modelo numérico para un inyector y validar los resultados para este caso, la geometría y mallado interno y circundante fueron replicados para construir el modelo de los 34 inyectores de alquilación del sistema en estudio. La malla necesaria para poder capturar las características más relevantes del flujo requirió 14 millones de elementos.

2.1 Estudio experimental

Ante la imposibilidad práctica de realizar mediciones y experimentos con ácido e hidrocarburos, con la intención de tener experimentos controlados para validar el estudio numérico, se diseñó y construyó un banco de ensayos de inyección de flujo de agua coloreada en un recipiente lleno de agua. Este consistió en un tubo vertical de 254 mm de diámetro interno y 1.80 m de altura. Los objetivos fueron: por una parte, visualizar y caracterizar el flujo para distintas condiciones de presión de entrada o caudal, y por otra, comparar la configuración fluidodinámica obtenida experimentalmente con aquella obtenida a través de la simulación numérica, a fin de validar este modelo para este caso particular previamente a su empleo con los fluidos en estudio. La Figura 1 muestra un esquema del conjunto y la instrumentación del ensayo previsto. Un recipiente parcialmente lleno de agua coloreada es presurizado por medio de un compresor de aire hasta la presión de inyección deseada, la que para distintos ensayos se ubicó entre 2 y 8 bares. Una vez alcanzada la presión deseada, la apertura de una válvula permite la inyección de agua coloreada en el tubo parcialmente lleno con agua limpia. El flujo es filmado con una cámara de alta velocidad y la presión del recipiente es registrada mediante un manómetro piezoeléctrico y almacenada en la PC como archivos de datos presión y tiempo.

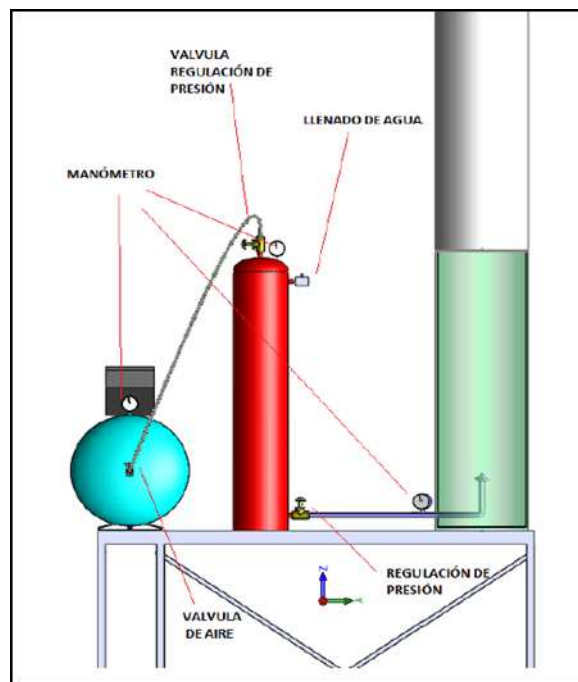


Figura 1: Esquema para ensayos de inyección líquido-líquido.

2.2 Modelado numérico del flujo de un inyector de agua en agua

A partir del relevamiento geométrico de un inyector (ver Fig. 2), se detectó que el flujo ingresa al mismo por un conducto excéntrico y en una trayectoria con un ángulo de inclinación con respecto al plano de entrada. Debido a esto se descartó por poco realista la idea original de realizar estudios 2D axialsimétricos. Se definió y se discretizó un dominio 3D consistente en el inyector, el conducto de ingreso de flujo al mismo y el tanque de descarga cilíndrico vertical utilizado en los ensayos.

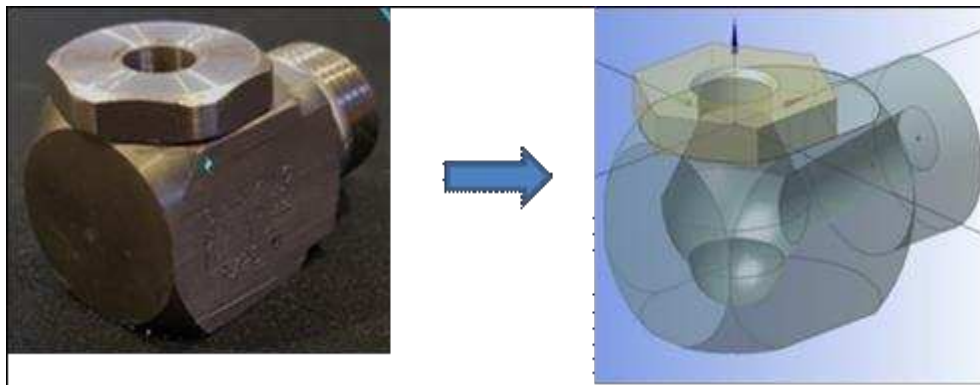


Figura 2: Geometría del inyector.

La Figura 3 muestra el dominio y detalles de la malla, tanto externa como interna del inyector.

Se utilizó una malla de tipo híbrida, de $1.2E6$ elementos. Tanto el caudal como la presión de entrada se consideraron constantes. En una primera etapa, parte del análisis se centró en la posible detección de cavitación en el flujo, utilizando el modelo de mezcla “Mixture Model” para flujo multifásico. Los resultados, tanto de la simulación como del ensayo, no mostraron que se produjera cavitación en estas condiciones de operación. En consecuencia, y para optimizar los tiempos de simulación se empleó en los cálculos siguientes un modelo monofásico.

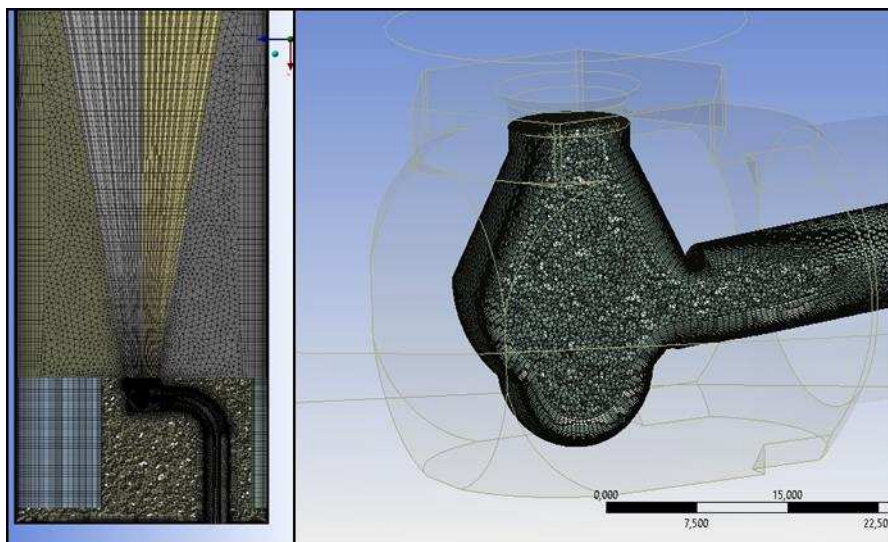


Figura 3: Detalle del dominio y de la malla del interior del inyector

Para la simulación se utilizó el programa ANSYS Fluent, tomando como condición de entrada para el agua inyectada la presión medida en los ensayos, y presión atmosférica en la superficie libre del agua del tanque. El método de solución seleccionado fue el basado en presiones; para el acoplamiento presión-velocidad se utilizó el esquema *PISO*, para la discretización espacial se emplearon esquemas tipo “*upwind*” de segundo orden, para la presión se empleó el algoritmo *PRESTO!* mientras que para la fracción de volumen se utilizó el algoritmo *QUICK* (Ref: *ANSYS Fluent User's Guide* 2016).

En función de los recursos computacionales disponibles para la evaluación del conjunto, se debieron descartar modelos de turbulencia que no fueran del tipo RANS. Dentro de estos modelos, se analizaron los resultados del $k-\omega$ SST, $k-\epsilon$ standard y $k-\epsilon$ Realizable. El modelo de turbulencia seleccionado fue el $k-\epsilon$ Realizable, de dos ecuaciones. La ventaja de este modelo es su relativa insensibilidad al valor de y^+ correspondiente al primer elemento de fluido adyacente a la pared, lo que permite obtener buenos resultados con relativa economía de elementos cuando la capa límite no es importante en la configuración del flujo. En este problema la fricción de las paredes no juega un papel crítico, y las visualizaciones de los resultados con el modelo $k-\epsilon$ Realizable aproximaron bien lo observado en experimentos, por lo que se optó por utilizar este modelo.

2.3 Modelado del flujo de un cluster de inyectores de alquilación

Parte del dominio de cómputo del conjunto de inyectores se muestra en la Figura 4. El sistema de inyección consiste en un conducto principal de ingreso de HC el cual descarga en un recipiente cóncavo desde donde se distribuye el fluido a través de 17 conductos que, a su vez, descargan mediante un conjunto de 34 inyectores verticales distribuidos en dos planos diferentes. Esto, en teoría, permite una mezcla gradual del HC con el HF además de conseguir alojar todos los inyectores sin excesivo bloqueo en los planos de descarga.

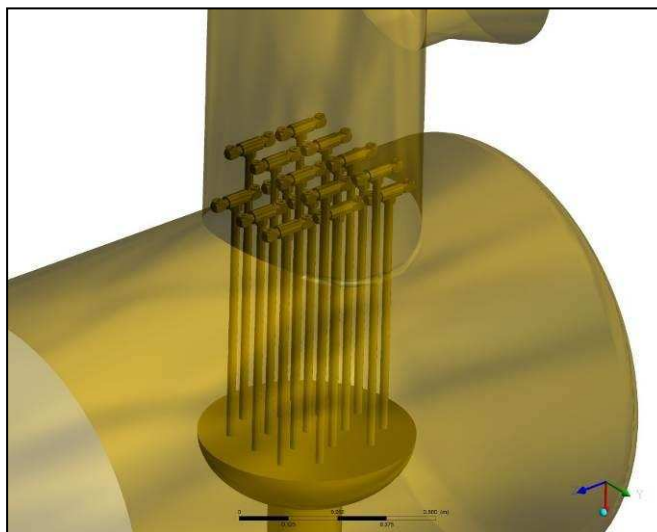


Figura 4: detalle del dominio de cómputo, con los conductos e inyectores de HC

Para el mallado del modelo se utilizó una estrategia de mallado multibloque que consiste en subdividir el dominio completo en un número de subdominios, cuya forma y disposición permita generar mallas controladas en cantidad y calidad de elementos. El modelo en estudio fue subdividido en 114 subvolúmenes. La malla es del tipo híbrida: en algunos subdominios se usaron mallas no estructuradas, puntualmente en los volúmenes con formas o contornos irregulares mientras que en aquellos con formas regulares o cierto grado de simetría se emplearon mallas estructuradas, como se aprecia en la Figura 5. En total, la malla para este dominio tiene aproximadamente 14 millones de elementos.

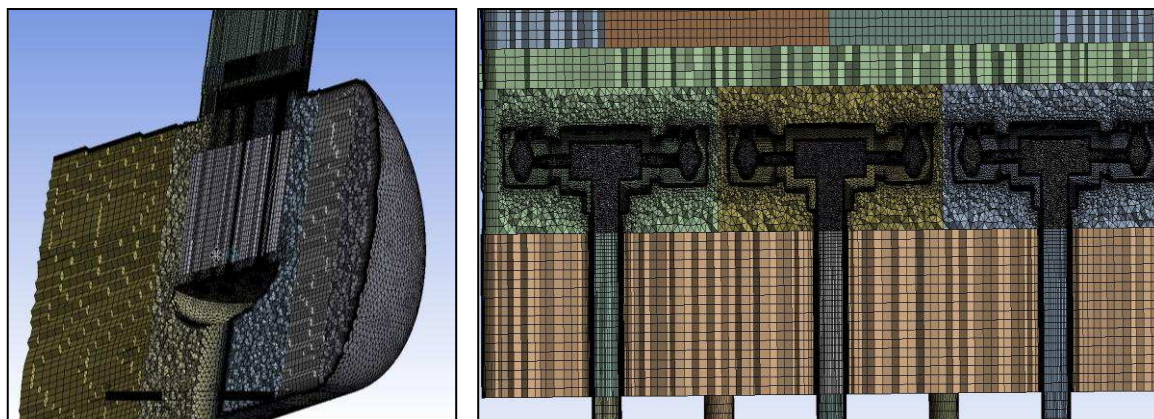


Figura 5: Mallado. Izquierda: detalle del conjunto, derecha: plano vertical a través del nivel superior de inyectores.

Debido a la presencia de dos fluidos diferentes, para evaluar el comportamiento de cada fase pura y de la mezcla se seleccionó el modelo multifásico “*Mixture*” con dos especies. El análisis se inició en régimen estacionario para luego, con la solución inicial obtenida, proseguir con el análisis en régimen transitorio. Los pasos de tiempo se fueron ajustando con el correr de la simulación y variaron entre 10^{-3} y 10^{-6} segundos.

Una vez configurado el caso y estabilizados los resultados iniciales, el tiempo neto de simulación fue de 10 días, en 88 procesadores *Intel Xeon* corriendo en paralelo.

3. RESULTADOS

3.1 Resultados de un inyector de agua en agua

La Figura 6 ilustra la secuencia de inyección de agua coloreada en agua clara, desde la apertura hasta el establecimiento un flujo constante. El agua coloreada fue presurizada a 8.27 bar. Si bien no es evidente en las imágenes, los videos y visualizaciones directas permitieron ver que el flujo era inyectado con una importante componente de velocidad tangencial.

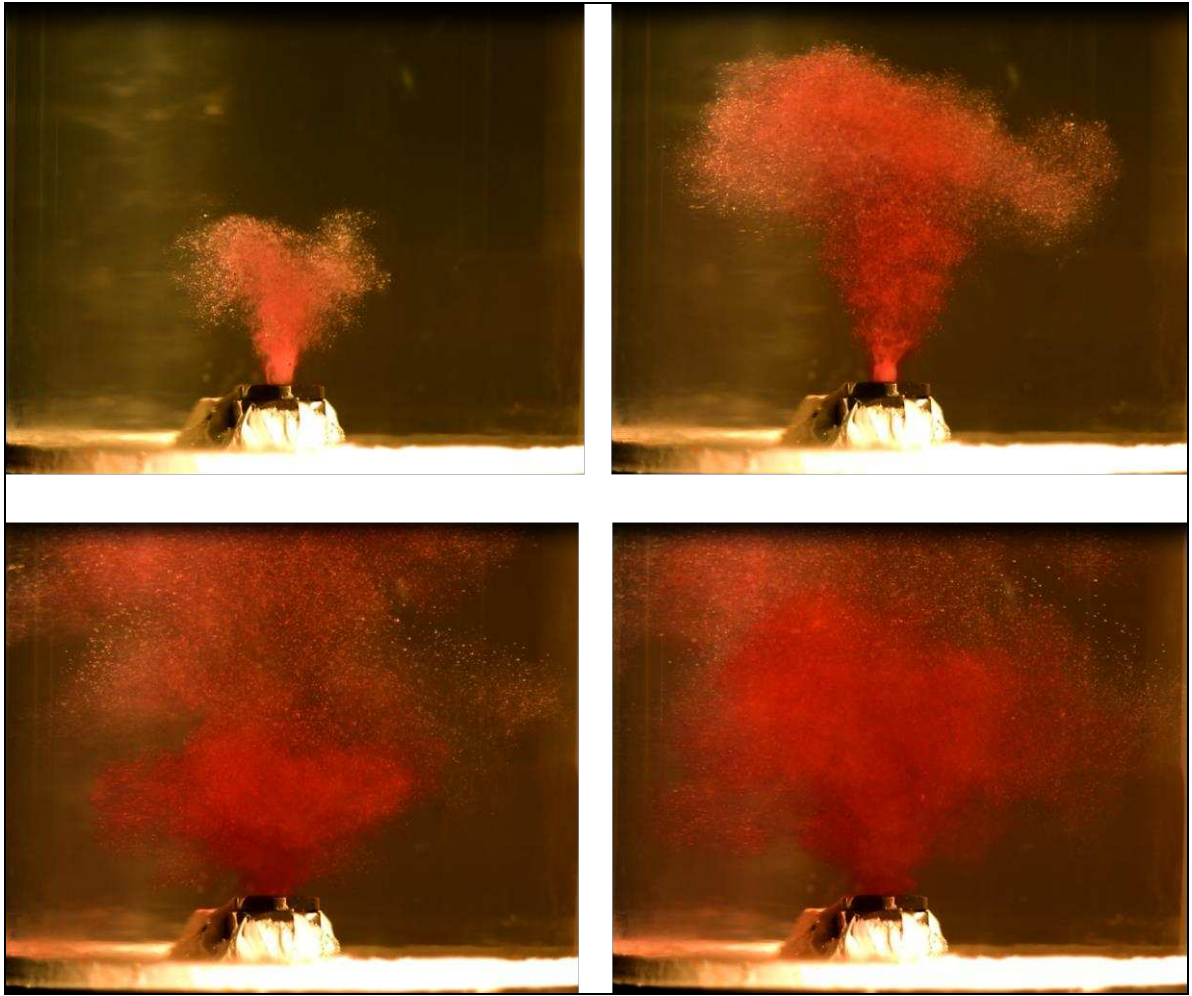


Figura 6: Secuencia de inyección de agua coloreada en agua clara. Presurización 8.27 bar.

La comparación del chorro visualizado en los experimentos con la proyección de los vectores velocidad del flujo da una muy buena concordancia, como se ve en la figura 7, en la que se intensificó el contraste y la saturación de color para una mejor visualización. El ángulo del cono con la horizontal fluctúa entre 55 y 65 grados. La Figura 7 permite comparar el cono de inyección filmado con los vectores velocidad del flujo en la sección de salida, que muestran prácticamente el mismo ángulo de abertura, lo que contribuye a validar la simulación numérica.



Figura 7: Imagen del chorro (color modificado) y vectores calculados en la sección de salida del inyector.

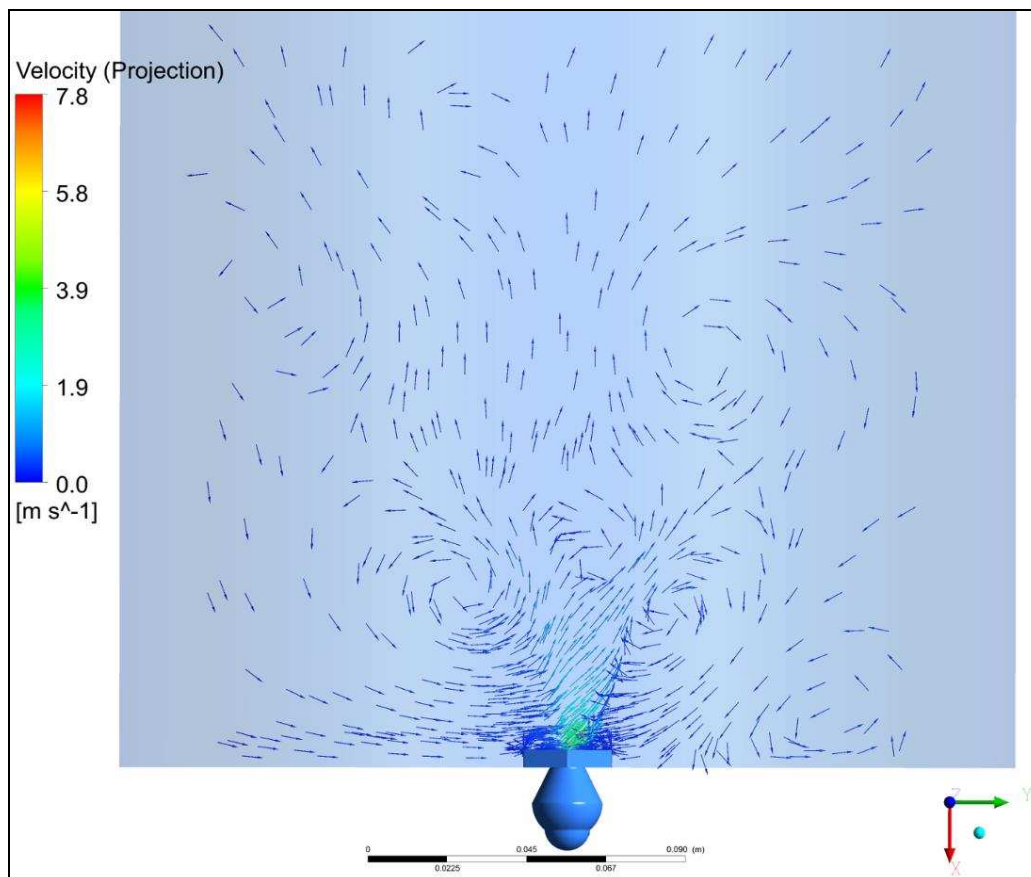


Figura 8: Proyección de la velocidad en un plano central vertical. Vectores coloreados según módulo de velocidad.

Los resultados del cómputo permiten observar distintas características del campo de velocidades del flujo. El chorro genera en el líquido del tanque, originalmente en reposo, la formación de remolinos de circulación vertical y baja velocidad, como muestra la Figura 8, los que producen corrientes descendentes en distintas regiones del cilindro y un flujo convergente hacia el inyector en la zona inferior. Este tipo de movimientos pudo apreciarse también en las filmaciones de los experimentos. Se considera que la similitud entre los resultados numéricos y la configuración observada en el experimento cumple el objetivo de validar la simulación. La distribución de velocidad en el chorro inyectado es altamente no uniforme. Tanto la componente axial como la tangencial del campo de velocidades son mayores hacia la pared del inyector y en la zona externa del chorro, y se reducen notablemente en el núcleo central. La estructura del flujo dentro del inyector consiste en un vórtice que se estrecha en la salida y se abre en el recipiente, manteniendo su rotación. La Figura 9 muestra líneas de corriente y su velocidad en distintos sectores del inyector, y en la Figura 10 pueden apreciarse los vectores velocidad en distintas circunferencias en el plano de salida. El fluido en el núcleo central rota con baja velocidad y esta aumenta a medida que consideramos flujo en zonas de radio mayor. En el eje del inyector una parte del flujo reingresa desde el recipiente hacia el interior, mientras que el flujo que se inyecta hacia el exterior forma una corona circular. Se detecta también flujo descendente causado por recirculación en un anillo de aproximadamente 1 mm de ancho justo sobre el borde externo del inyector, recirculación originada por desprendimientos de la capa límite en la sección divergente de la descarga.

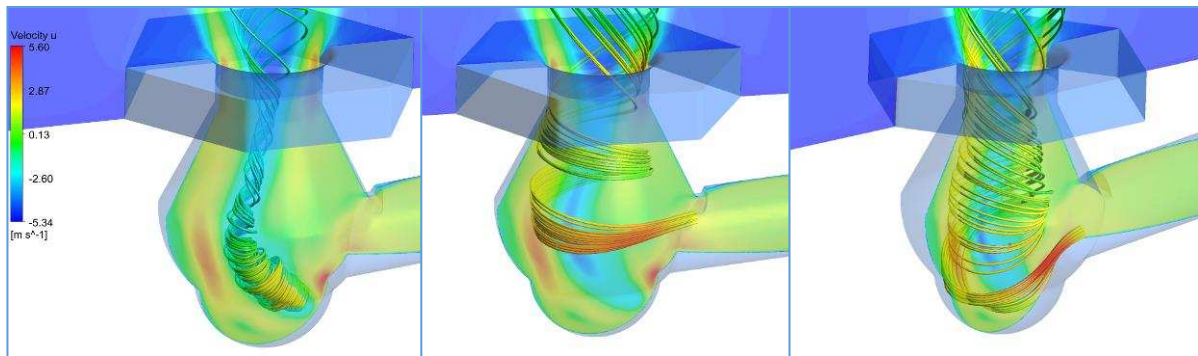


Figura 9: Líneas de corriente y velocidad en distintas regiones del fluido en el inyector

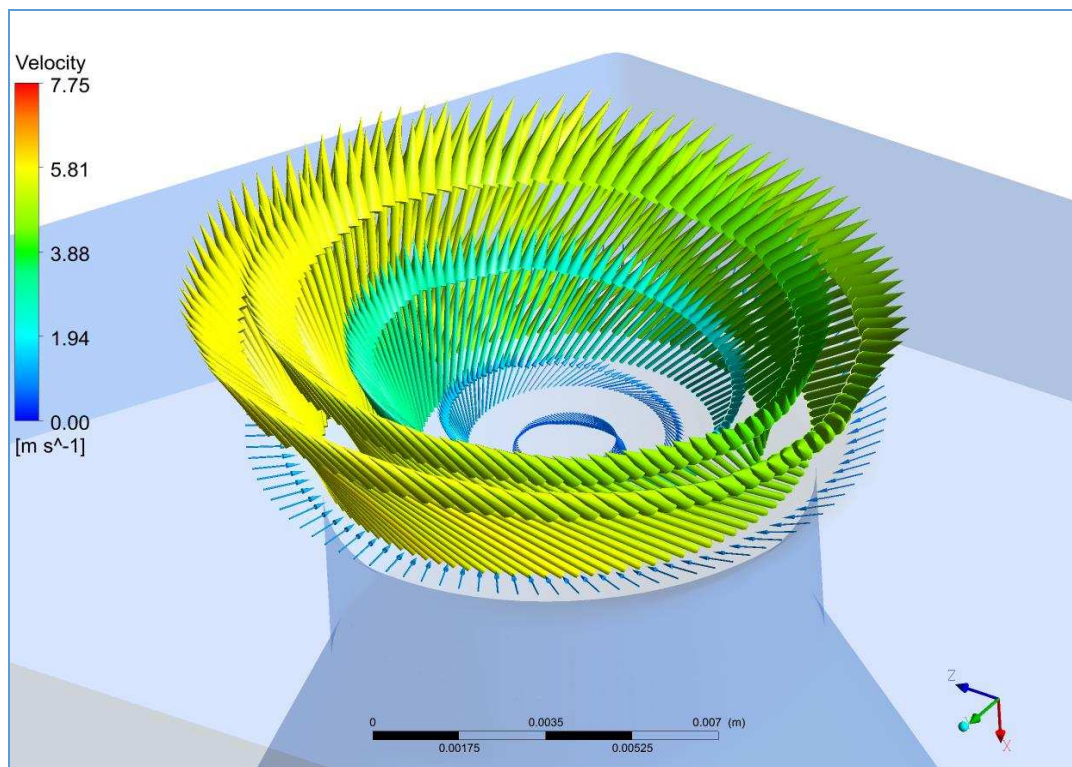


Figura 10: Distribución de la velocidad de flujo en el plano de salida de un inyector aislado.

3.2 Resultados del cluster de inyectores de alquileración

La configuración del flujo de hidrocarburos introducidos en el lecho de ácido fluorhídrico a través del conjunto de 34 inyectores presenta una complejidad considerable. Una instantánea del campo de velocidades se muestra en la Figura 11 para un plano vertical a través del conjunto de inyectores, permitiendo tener un panorama de las zonas de recirculación que aparecen en la región de inyección y mezcla de los fluidos.

El número de Reynolds para el HC a la salida de los inyectores es en el orden de $1e6$, por lo que el proceso de mezcla inmediatamente a la salida está fuertemente dominado por la turbulencia.

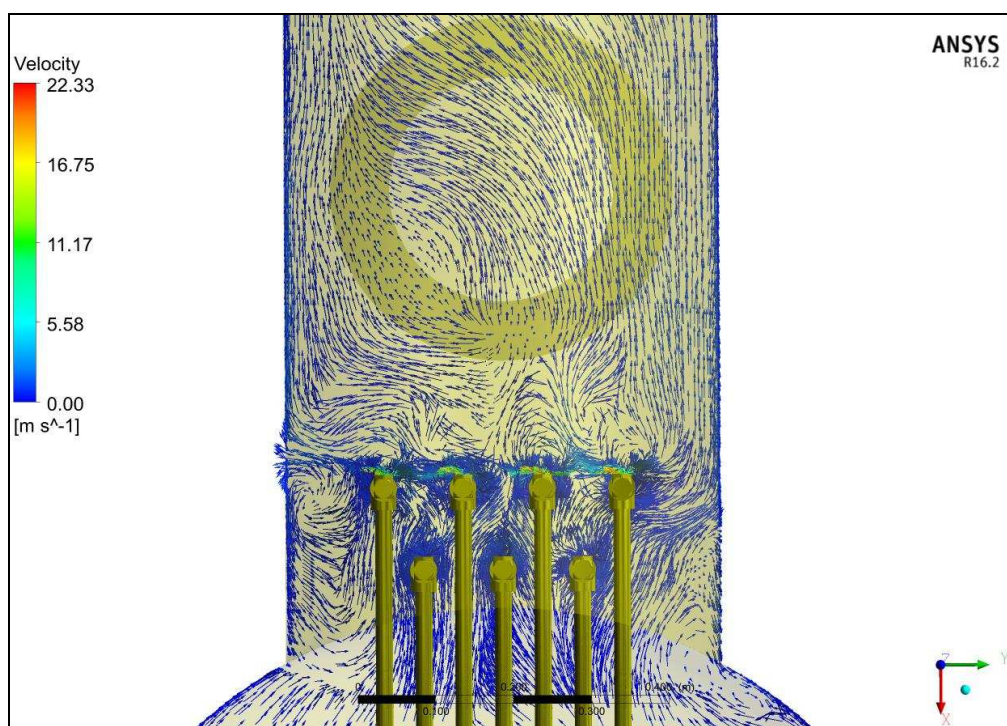


Figura 11: Vectores velocidad en un plano vertical que atraviesa la línea central de inyectores.

Analizando las líneas de corriente originadas en cada inyector, se encuentran patrones muy diversos, en el que el flujo recorre trayectorias tridimensionales en las que desciende y vuelve a ascender y se integra rápidamente en el patrón de flujo global. Por economía de espacio se muestran solamente dos imágenes con tres vistas de las líneas de corriente originadas en uno de los inyectores del nivel inferior y uno de los del nivel superior respectivamente, que ejemplifican lo anteriormente expuesto (ver Figura 12).

La interacción con el flujo de HF y el de HC de inyectores vecinos hace que, si bien el flujo dentro de cada inyector sea similar al determinado en el caso de uno aislado (ver Figura 13), en la salida el patrón cambia, teniendo cada uno un cono de descarga no estacionario y mucho más abierto, como se ve en la Figura 14.

Las figuras 15 y 16 muestran la concentración del hidrocarburo inyectado en la mezcla con el ácido fluorhídrico. En particular, la Figura 15 muestra la región de salida de un par de inyectores, y la Figura 16 el conducto del “riser” en el que se produce la reacción.

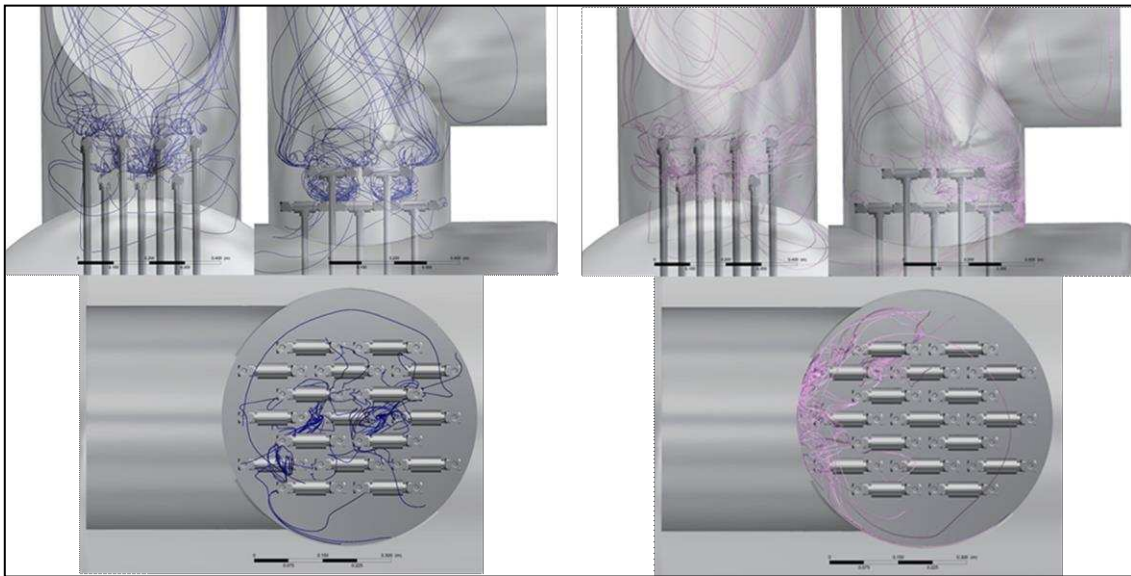


Figura 12: Líneas de corriente originadas en un inyector del nivel inferior (izquierda) y uno del nivel superior (derecha).

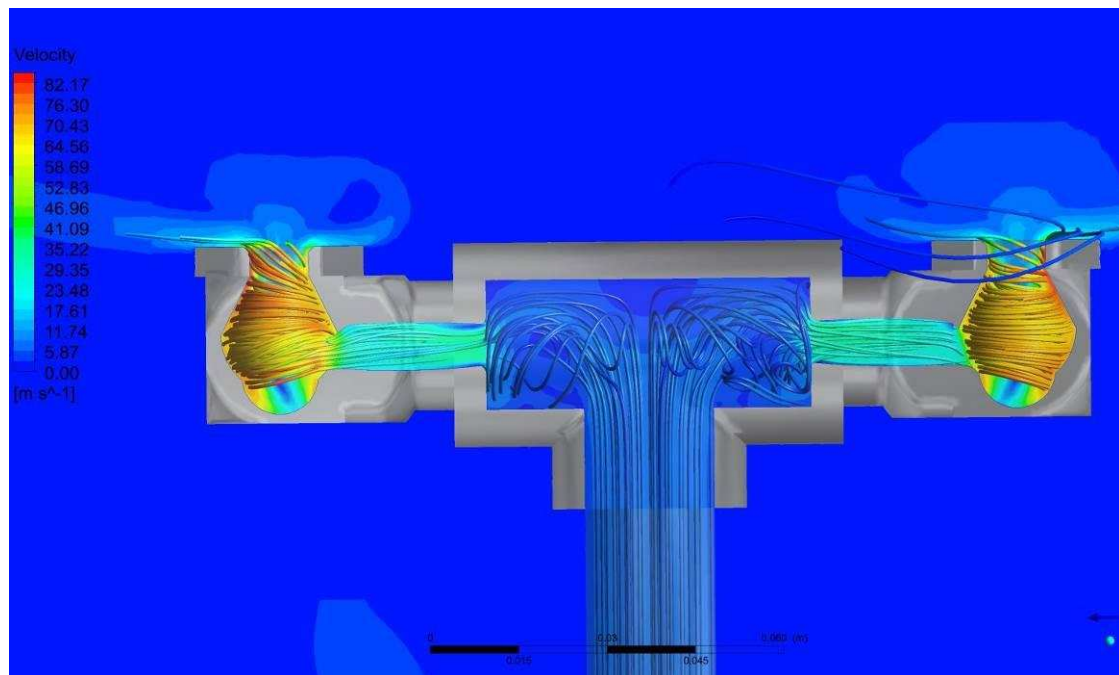


Figura 13: Flujo en par de inyectores de hidrocarburo.

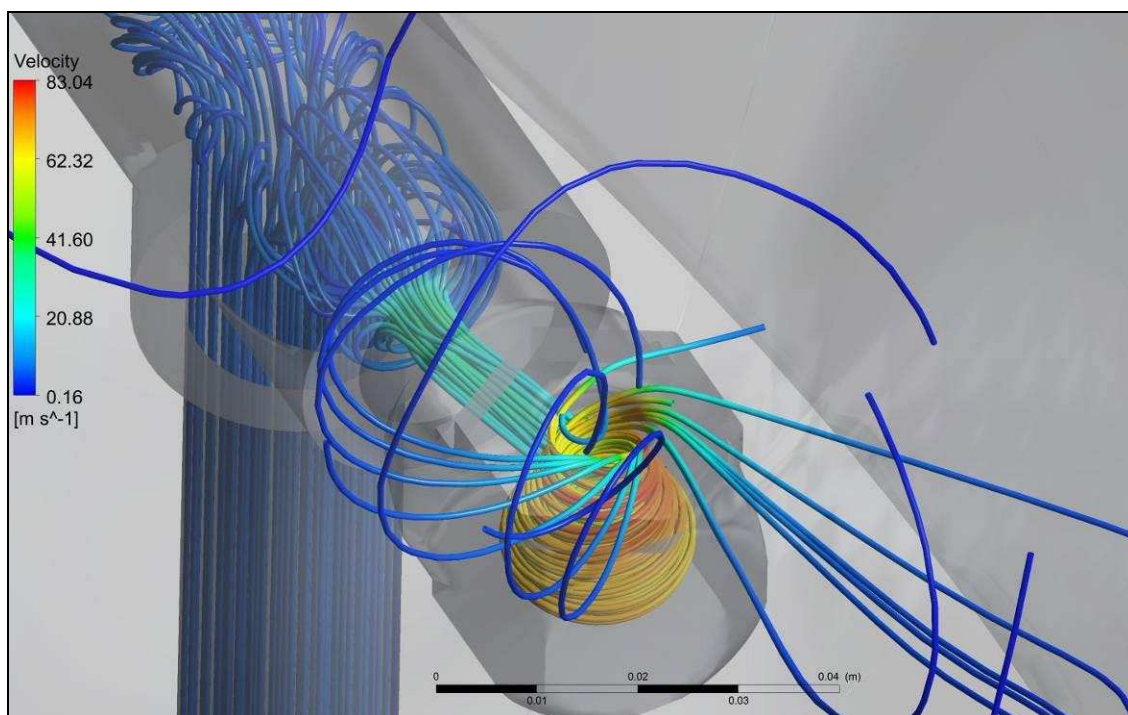


Figura 14: Flujo a la salida de un inyector del conjunto.

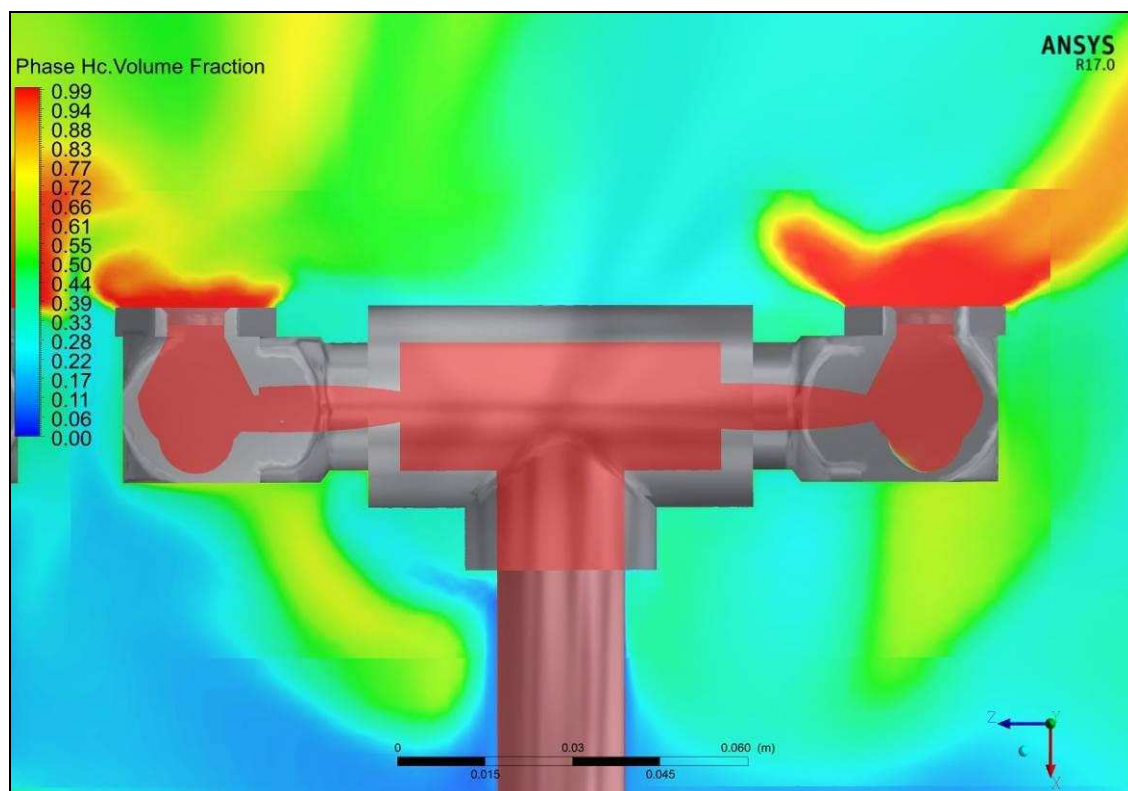


Figura 15: Concentración volumétrica de HC en descarga de un par de inyectores

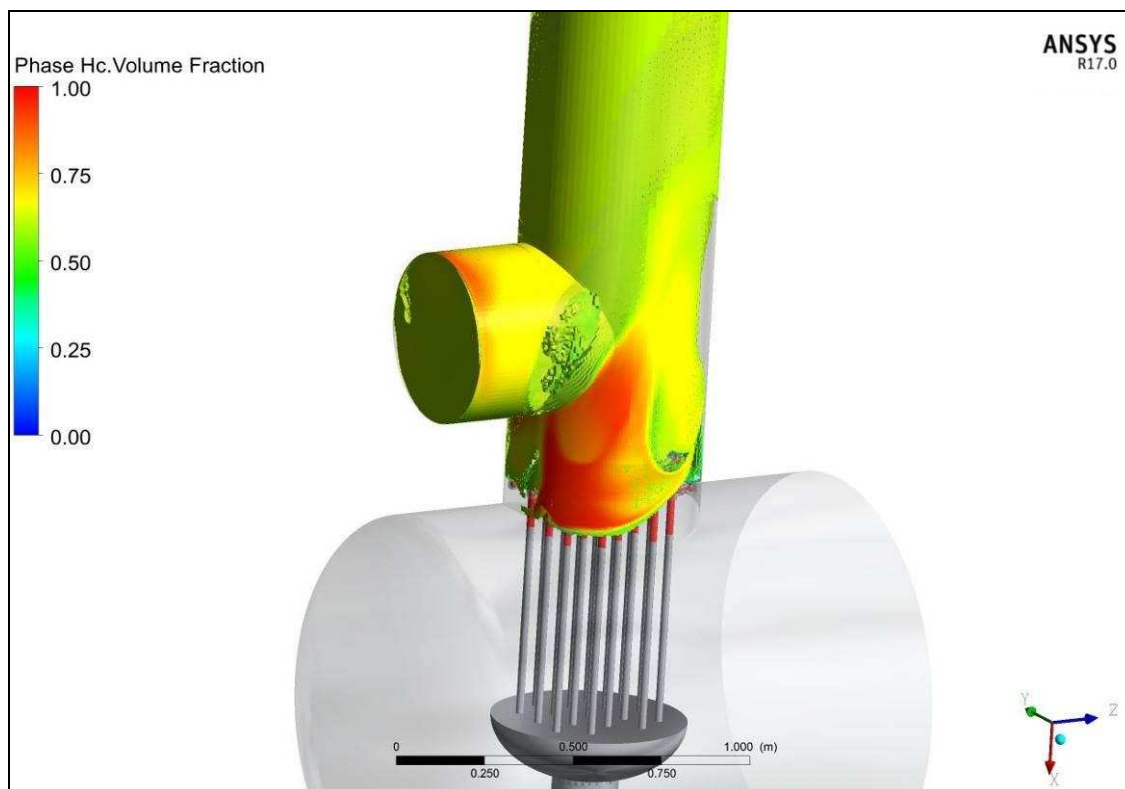


Figura 16: Concentración volumétrica de HC en “riser”. Solo se muestran para mayor claridad las regiones con concentración mayor a 0. La concentración final alcanza el valor 0.75.

Se observa que a una distancia vertical de los inyectores de entre uno y dos diámetros del conducto, se ha logrado una mezcla razonablemente homogénea.

4. CONCLUSIONES

El resultado más importante de este trabajo es poder contar con un modelo validado para el flujo multifásico que se desarrolla en un sistema de alquilación. Esto permitirá analizar su funcionamiento y la eficiencia de mezclado para distintas condiciones de caudales y presiones de entrada.

El flujo para el conjunto de inyectores muestra un patrón no estacionario muy complejo, con zonas de recirculación y remolinos entre ambos niveles de inyección de HC en HF, lo que sin duda favorece la mezcla y reacción de sus componentes. Este efecto es mayor para los inyectores del nivel inferior, pero también aparece en los del nivel superior, y extiende el “tiempo de residencia” para las reacciones químicas (no consideradas en este modelo) que se llevan a cabo en el proceso de alquilación.

El modelo desarrollado puede ser modificado para incluir estas reacciones químicas, optimizar la distribución de inyectores para mejorar la eficiencia de las mismas y analizar la eficiencia global del proceso ante la modificación de cualquiera de las variables involucradas.

En el futuro se prevé un análisis más detallado del proceso de atomización en la salida de los inyectores para una mejor evaluación del proceso de mezcla y reacción producido en los mismos.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue llevado a cabo en el marco de un convenio de cooperación para el estudio del flujo en un “riser” de alquilación entre YPF-Tecnología y la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata.

REFERENCIAS

- Andrade C. N. da C. and Tsien, L. C. The velocity distribution in a liquid-to-liquid jet. *Proceedings of the Physical Society*. 49: 381-391, 1937.
- ANSYS Fluent User Guide V.17. 2015
- API Recommended Practice 751: *Safe Operation of Hydrofluoric Acid Alkylation Units*. 4ta. Edición, 2012.
- Dobis, J. The Top Ten corrosion issues affecting HF Alkylation units. Paper 07570, *NACE Corrosion Conference and Exposition*. 2007.
- Raynal L., Augier, F., Bazer-Bachi, F., Haroun, Y. and Pereira da Fonte, C. CFD Applied to Process Development in the Oil and Gas Industry - A Review. *Oil and Gas Science and Technology, Rev. IFP Energies nouvelles*. 71, 42, 2016.
- Reynolds, A. J.: Observations of a liquid-into-liquid jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 14: 552-556, 1962.
- Richards, J. R., Lenhoff, A. M. and Beris, A. Dynamic breakup of liquid-liquid jets. *Physics of Fluids* 6: 2640-2656, 1994.
- Strutt J. W. and Lord Rayleigh. On the instability of jets. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 10: 4-13, 1878.